

複合材料の周期境界値問題における 高速多重極法と均質化法への応用

An FMM for periodic rigid-inclusion problems and its application to homogenisation problems

法崎健二*・西村直志**・大谷佳広***・吉川仁****

Kenji HOUZAKI, Naoshi NISHIMURA, Yoshihiro OTANI and Hitoshi YOSHIKAWA

*学生会員 京都大学大学院工学研究科 社会基盤工学専攻 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

**正会員 工博 京都大学学術情報メディアセンター教授 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

***学生会員 工修 京都大学大学院工学研究科 社会基盤工学専攻 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

****正会員 工博 京都大学大学院工学研究科 社会基盤工学専攻 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

This paper presents an FMM formulation for periodic boundary value problems for two dimensional rigid-inclusion problems. This formulation uses a potential representation for periodic boundary value problems which includes no divergent series. Also an application to homogenisation problems is considered in order to obtain a macroscopic elastic constant based on a microscopic structure.

Key Words : FMM, Rigid-Inclusion Problems, Periodic Problems, Homogenisation

1. はじめに

近年、カーボンナノチューブ (CNT) を配合した複合材料の工学的応用が注目されている。CNT は、剛性が通常用いられる樹脂などの母材のそれに比べて 2 桁以上大きいなど、優れた力学的特性を有している事が知られており¹⁾、その巨視的弾性定数の決定は工学的に重要である。通常、CNT 複合材料の解析には分子動力学が用いられる事が多いが、連続体近似も十分実用的である。ただし、CNT は大きさや形状がまちまちであったり、曲がっていたり、捻れていたたり、束になっていたりするので、連続体近似を用いたとしても巨大な問題を解く事が必要になる。このような解析を差分や有限要素法で解くと未知数の数 (N) が膨大になる。通常の境界積分方程式法を用いると、未知数は比較的少なく済むが、係数行列が密であるため、かえって解ける問題の規模は小さくなる。この問題を一気に解決したのが多重極境界積分方程式法である。多重極法は従来の境界積分方程式と同等の計算を $O(N)$ の計算量で実現する事ができる。実際、Liu ら¹⁾は高速多重極法を用いて、CNT を剛体でモデル化する事により、複合材料の巨視的弾性定数、つまり非均質体を均質体であると見做した時の弾性定数を決定している。

一方、微視構造を有する物質の巨視的な力学特性を導く理論として、均質化法が注目されている。均質化法は、周期的なマイクロ構造 (ユニットセル) を有する非均質体を、物質の平均的な挙動を記述するマクロスケールと、マイクロ構造内の挙動を記述するミクロスケールを導入して、等価な均質体に置き換えるための方法論の一つである。均質化法においては、微視構造における周期境界値問題を解く必要がある。その際、CNT 複合材料などの応用を考えると、微視構造の解析もかなり大規模なものとなる事が想定される。

このような背景を考慮し、本論文では、微視構造と

して複数の剛体介在物を含む複合材料を考え、周期境界条件下での高速多重極境界積分方程式法を定式化する。ただし、実用上必要となる 3 次元弾性問題の境界積分方程式を取り扱うための基礎的研究として、ここでは 2 次元 Laplace 方程式で記述される面外せん断問題を考える。Laplace 方程式の周期境界条件下での高速多重極法は、Greengard & Rokhlin²⁾ の初期の論文から研究されているが、そこではいわゆる繰り込みの方法が用いられており、発散級数を物理的考察により有限な項に置き換えるなど、数学的にはやや不明確な点が残されている。そこで、松村ら⁷⁾は Laplace 方程式の crack 問題において発散級数を含まない定式化を示した。しかし、松村らの定式化は 2 重層核のみを含み、1 重層によって定式化される介在物問題とは異なる。この相違は Laplace 方程式の周期的基本解が存在しない事を考慮すると、本質的であると考えられる。そこで、本論文では、介在物の釣合条件を用いる事によって、介在物問題においても crack 問題同様、周期境界値問題の多重極法が定式化できる事を示す。また、応用として、得られた手法と均質化法を組み合わせる事によって微視的な力学挙動をとらえ、微視構造を反映した複合材料の巨視的な弾性定数を導出する。

2. 定式化

2.1 境界積分方程式法

2 次元 Laplace 方程式における剛体介在物の周期境界値問題は、以下のように表される。

$$\text{基礎方程式} \quad \Delta u = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (1)$$

$$\text{剛体での境界条件} \quad u = C \quad \text{on } S \quad (2)$$

$$\text{釣合条件} \quad \int_S \frac{\partial u}{\partial n} dS = 0 \quad (3)$$

$$\text{周期境界条件} \quad u(\mathbf{x}^1) = u(\mathbf{x}^2) \quad \text{on } \Gamma \quad (4)$$

$$\frac{\partial u(\mathbf{x}^1)}{\partial n} = -\frac{\partial u(\mathbf{x}^2)}{\partial n} \quad \text{on } \Gamma \quad (5)$$

ここに Ω は介在物を除いたユニットセル、 Γ は Ω の外側の境界、 S_I は I 番目の剛体介在物の境界、 $S = \bigcup_I S_I$ 、 $\mathbf{n}$ は境界について外向きの単位法線ベクトル、 $\mathbf{x}^1$ と $\mathbf{x}^2$ は Γ 上で互いに反対側の点である (図1)。また、(2) は u が各 S_I 上で異なる定数 C_I となる事を意味する。

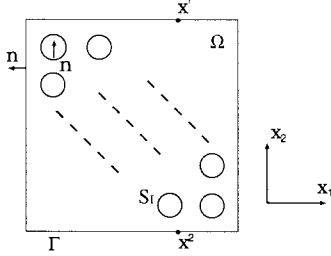


図-1 2次元剛体介在物の周期境界値条件

問題の解の積分表現は次のようになる。

$$\begin{aligned} u(\mathbf{x}) = & \int_S G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial u(\mathbf{y})}{\partial n_y} dS_y - \int_S \frac{\partial G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} u(\mathbf{y}) dS_y \\ & + \int_\Gamma G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial u(\mathbf{y})}{\partial n_y} d\Gamma_y - \int_\Gamma \frac{\partial G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} u(\mathbf{y}) d\Gamma_y \end{aligned} \quad (6)$$

ここに G は 2 次元ラプラス方程式の基本解で、

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \frac{1}{2\pi} \log \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \quad (7)$$

である。一方、 Ω 内で

$$0 = \int_S \frac{\partial G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} C dS_y \quad (8)$$

であるので、式 (2), (6), (8) より

$$\begin{aligned} u(\mathbf{x}) = & \int_S G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial u(\mathbf{y})}{\partial n_y} dS_y \\ & + \int_\Gamma G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial u(\mathbf{y})}{\partial n_y} d\Gamma_y - \int_\Gamma \frac{\partial G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} u(\mathbf{y}) d\Gamma_y \end{aligned} \quad (9)$$

となる。さらに、 $\mathbf{x}$ を Γ 上、 S 上へそれぞれ近づけると、次の境界積分方程式が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{u(\mathbf{x})}{2} = & \int_S G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial u(\mathbf{y})}{\partial n_y} dS_y \\ & + \int_\Gamma G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial u(\mathbf{y})}{\partial n_y} d\Gamma_y - \int_\Gamma \frac{\partial G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} u(\mathbf{y}) d\Gamma_y \end{aligned} \quad \text{on } \Gamma \quad (10)$$

$$\begin{aligned} C = & \int_S G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial u(\mathbf{y})}{\partial n_y} dS_y \\ & + \int_\Gamma G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial u(\mathbf{y})}{\partial n_y} d\Gamma_y - \int_\Gamma \frac{\partial G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} u(\mathbf{y}) d\Gamma_y \end{aligned} \quad \text{on } S \quad (11)$$

直接法では式 (10), (11) および式 (3) を離散化し、代数方程式に帰着させて解く。

3. 高速多重極境界積分方程式法

2 次元 Laplace 方程式の多重極法は既に確立したものであるが²⁾、参照の便宜のため以下にその概要をまとめる。なお、周期境界条件は一旦除外し、無限領域中の剛体介在物を考える。

3.1 階層構造の導入

まず多重極法を用いるのに必要となる階層構造について述べる。無限領域中に存在する全ての剛体を囲むような正方形をつくり、この正方形をレベル 0 のセルと呼ぶ。レベル 0 のセルを順次分割する事によりセルの階層構造を形成する。2 次元の問題ではセルの分割は、図 2 のように 1 つの正方形を 4 つの正方形に分割する。このとき分割によって得られた 4 つのセルを元のセルの子セルといい、子セルに対して元のセルは親セルと呼ばれる。またレベル 0 のセルを 4 分割して得られるセルをレベル 1 のセルとし、分割毎に順次得られた子セルに対しレベルを与える (図 3)。分割の途中である一定数の要素を含まないセルが現れた場合は、そのセルに対してはそれ以上分割は行わない。最終的にセルがあらかじめ定めておいた数以下の境界要素を含むか、あるいは階層構造の深さがある値になるまで分割を繰り返す。こうして得られたそれ以上分割されない最下層のセルをリーフと呼ぶ。

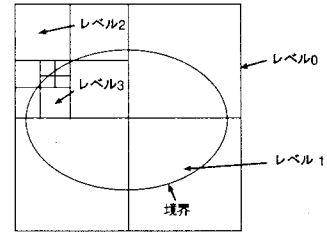


図-2 セル分割

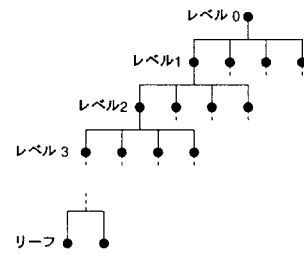


図-3 階層構造

3.2 多重極展開、多重極モーメント

無限領域中の剛体介在物の場合、解の積分表現は次のようになる。

$$u(\mathbf{x}) = \int_S G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial u(\mathbf{y})}{\partial n_y} dS_y \quad (12)$$

ここで、

$$z = x_1 + ix_2, \quad \zeta = y_1 + iy_2 \quad (13)$$

とおくと、式(12)は

$$u(x) = -\frac{1}{2\pi} \operatorname{Re} \left[\int_S \log(z - \zeta) \frac{\partial u(\zeta)}{\partial n} dS_\zeta \right] \quad (14)$$

と書ける。ここに $i = \sqrt{-1}$ である。

$|\zeta - \zeta_0| \ll |z - \zeta_0|$ である ζ の近傍の点 ζ_0 を用いると、基本解 G は

$$G(z, \zeta) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=0}^{\infty} O_k(z - \zeta_0) I_k(\zeta - \zeta_0) \quad (15)$$

となる。ここで

$$I_k(z) = \frac{z^k}{k!} \quad \text{for } k \geq 0 \quad (16)$$

$$O_k(z) = \frac{(k-1)!}{z^k} \quad \text{for } k \geq 1, \quad O_0(z) = -\log z \quad (17)$$

である。したがって、式(14)は

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{S_0} \left[\sum_{k=0}^{\infty} O_k(z - \zeta_0) I_k(\zeta - \zeta_0) \right] \frac{\partial u(\zeta)}{\partial n} dS_\zeta \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{k=0}^{\infty} O_k(z - \zeta_0) M_k(\zeta_0) \end{aligned} \quad (18)$$

となる。ここに

$$M_k(\zeta_0) = \int_{S_0} I_k(\zeta - \zeta_0) \frac{\partial u(\zeta)}{\partial n} dS_\zeta \quad (19)$$

は ζ_0 における多重極モーメントである。また式(18), (19)における S_0 は、 ζ_0 の近傍における S の部分集合である。

多重極モーメントの計算は、最下層のレベルから順に上に向かって行う(この過程を upward pass という)。最下層のレベルでの多重極モーメントは式(19)により求める。そしてそれら子セルのモーメントの中心を親セルの中心に移動させて、4つの子セルのモーメントを足し親セルのモーメントを求める。このモーメントの原点移動(M2M)は以下の式で表される。

$$M_k(\zeta'_0) = \sum_{l=0}^k I_{k-l}(\zeta_0 - \zeta'_0) M_l(\zeta_0) \quad (20)$$

ここに、 ζ_0 は子セルの中心、 ζ'_0 は親セルの中心を表す。upward pass ではこの計算をレベル2のセルまで行う。

3.3 局所展開

式(12)の積分を剛体の境界上にある全ての要素で評価することを考える。 $|z - z_0| \ll |\zeta_0 - z_0|$ である z の近傍の点 z_0 に関して、式(18)を展開すると

$$u(x) = \sum_{l=0}^{\infty} L_l(z_0, \zeta_0) I_l(z - z_0) \quad (21)$$

と書ける。ここに

$$L_l(z_0, \zeta_0) = \frac{(-1)^l}{2\pi} \sum_{k=0}^{\infty} O_{l+k}(z_0 - \zeta_0) M_k(\zeta_0) \quad (22)$$

は局所展開係数である。

局所展開係数の計算は、レベル2のセルから順に下のレベルに向かって行う(この過程を downward pass という)。レベル2では定義どおりに式(21), (22)における z_0 を各セルの中心に取って $L_l(z_0, \zeta_0)$ を計算する。レベル2以下のセルでは、それぞれの親セル同士は隣接しているが、それら自身は隣接していないセルの組合せ(このようなセルの集合を interaction list と呼ぶ)に対しては、一方からの寄与を式(22)に従って計算する(M2L)。次にセル同士の親セルが隣接していない様なセルからの影響は、着目しているセルの親セルの局所展開係数の原点を移動したもので評価できるので、式(20)と同様にして得られる局所展開係数の移動公式

$$L_l(z'_0, \zeta_0) = \sum_{m=l}^{\infty} I_{m-l}(z'_0 - z_0) L_m(z_0, \zeta_0) \quad (23)$$

を用いて評価する(L2L)。ここに z'_0 は子セルの中心を、 z_0 は親セルの中心を表す。これらを加え合わせることで、着目しているセルの局所展開係数が計算される。最後に、着目しているセルに対して、それに隣接するリーフのセルからの影響、および、着目しているセルがリーフの時にはそのセルに隣接する同レベルのセルからの影響を直接計算により評価する。

4. 解の周期化

前節において、無限領域において剛体介在物が存在する場合の多重極法の定式化を行った。ここでは周期境界条件を満たす解を得るため、式(14)を周期化することを考える。周期境界条件はユニットセルと同じ構造をしたセルが無限に並んでいるものとして与えることにする。なお、式(10), (11)に従ってユニットセルの縁を離散化して周期境界値問題を解く手法もあるが、ユニットセル上での未知数が追加される、得られる係数行列が境界を考慮しないものに比べて悪条件になる等の問題が予想されることから望ましくないと考えられる。ここでは、周期の1単位を1辺の大きさが1の正方形とし、着目するセルの中心は原点にあるとする。

さて、無限に並んだユニットセルからの影響を考慮する際、一見

$$\sum_{\omega \in N_0} \log(z - \omega) \quad (24)$$

という級数が現れる様に思われる。ここに N_0 は

$$N_0 = \{\omega = m + in | m, n : \text{整数}\} \quad (25)$$

である。しかし式(24)は発散列であるので、式(24)にLaplace方程式の斉次解を付け加え、次のような絶対収束級数とする。

$$\log \sigma(z) = \log z + \sum_{\omega \in N} \left[\log \left(1 - \frac{z}{\omega}\right) + \frac{z}{\omega} + \frac{z^2}{2\omega^2} \right] \quad (26)$$

ここに、 N は

$$N = \{\omega = m + in | m, n : \text{整数}, \omega \neq 0\} \quad (27)$$

なる複素数の集合である。 $\log \sigma(z)$ は周期関数ではなく

$$\log \sigma(z+1) = \log \sigma(z) + \pi(z + \frac{1}{2}) \pm \pi i \quad (28)$$

$$\log \sigma(z+i) = \log \sigma(z) - \pi i(z + \frac{i}{2}) \pm \pi i \quad (29)$$

の性質を有する³⁾。そこで式 (14) を凝周期化して

$$J(z) = -\text{Re} \left[\frac{1}{2\pi} \int_S \log \sigma(z - \zeta) \frac{\partial u(\zeta)}{\partial n} dS_\zeta \right] \quad (30)$$

としてみると、式 (3) より

$$J(z+1) = J(z) + \frac{1}{2} \int_S y_1 \frac{\partial u(\zeta)}{\partial n} dS_\zeta \quad (31)$$

$$J(z+i) = J(z) + \frac{1}{2} \int_S y_2 \frac{\partial u(\zeta)}{\partial n} dS_\zeta \quad (32)$$

となる。従って、レベル 0 のセルの中心の座標で構成される lattice 上を z が 1 格子進むごとに、 J は定数だけ増加することがわかる。最後に、 J に線形項を加えて、この増分を打ち消す事によって、次の周期境界値問題の解表示が得られる。

$$u(x) = -\frac{1}{2\pi} \text{Re} \left[\int_S \log \sigma(z - \zeta) \frac{\partial u(\zeta)}{\partial n} dS_\zeta + \pi z \int_S \bar{\zeta} \frac{\partial u(\zeta)}{\partial n} dS_\zeta \right] \quad (33)$$

ここに $\bar{\zeta}$ は ζ の共役複素数である。

5. 周期境界値問題における 高速多重極境界積分方程式法

多重極法の周期境界値問題への適用について述べる。既に述べたとおり、周期境界値条件を、ユニットセルの回りにそれと同様の形をしたユニットセルが無限に並んでいるものとして再現する。周期境界値問題における高速多重極積分方程式法では、この周期の 1 単位、即ちユニットセルを 2.3 節で述べたレベル 0 のセルと同一のものとして解析を行う。レベル 0 のセルが無限に配置された領域に多重極法を用いるには、通常の高多重極法における upward pass, downward pass の両過程に修正を加える必要がある。まず upward pass であるが、通常の場合ではレベル 2 のセルまでであったところを、周期境界条件ではレベル 0 のセル (= ユニットセル) まで多重極モーメントを求める (upward pass における種々の計算に変更はない)。次に、レベル 0 でユニットセルに隣接していないセルからの式 (33) への寄与は、ユニットセルの中心に関する局所展開係数として評価し、その後、ユニットセルとそれに隣接する 8 つのセルに対して通常の downward pass を実行する。周期境界値問題を解くために、前節において求めた周

期化了解表現 (33) の $\log \sigma$ の $\sum_{w \in N}$ に関する項と、 z の線形項を補正する。集合 N', N'' を

$$N'' = \{\omega = m + in | m, n : -1, 0, 1, \omega \neq 0\} \quad (34)$$

$$N' = N \setminus N'' \quad (35)$$

で定義し、まずユニットセルの局所展開係数への N' からの寄与の計算法について述べる。 $\log \sigma$ 関数の $\sum_{w \in N'}$ に関する項 ($\log \sigma^p$ とする) の多重極展開を行うと次のようになる。

$$-\frac{1}{2\pi} \text{Re} \left[\int_S \log \sigma^p(z - \zeta) \frac{\partial u(\zeta)}{\partial n} dS_\zeta \right] = \sum_{l=0}^{\infty} \left[\frac{1}{2\pi} \sum_{w \in N'} \sum_{n=\max\{3,l\}}^{\infty} (-1)^{n-l} O_n(w) M_{n-l}(0) \right] I_l(z) \quad (36)$$

以上の結果に線形項の寄与を加えることにより、レベル 0 の局所展開係数は次のように計算される。

$$L_l(0) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=\max\{3,l\}}^{\infty} (-1)^{n-l} \left\{ \sum_{w \in N'} O_n(w) \right\} M_{n-l}(0) - \frac{1}{2} \delta_{l1} \overline{M}_1(0) \quad (37)$$

式 (37) の評価には、 $n \geq 3$ に対し、lattice sum

$$\sum_{w \in N'} O_n(w) \quad (38)$$

の値が必要となるが、この級数は絶対収束する。また対称性から、式 (38) が非零であるのは n が 4 の倍数の時に限ることが分かる。これらの lattice sum の値はあらかじめ数値計算により求めておく。

以上の取扱いとは本質的に Greengard & Rokhlin の方法²⁾に従っているが、Greengard & Rokhlin では発散級数を物理的考察で有限なものに置き換えているのに対して、本論文の方法では発散級数は現れない。この様にして、数学的厳密さを損なわずに N' からの寄与を計算できたことになる。 N'' からの寄与はこの節の始めて述べたとおり、レベル 0 のセルおよびそれに隣接するセルに対し downward pass を適用することで影響を評価する。

6. 均質化法

微視的なスケールにおいて、多数の剛体介在物を有する物質について次の問題を考える (図 4)。

基礎方程式

$$\Delta_X u = 0 \quad (\text{in } \Omega) \quad (39)$$

境界条件

$$\int_{S_I} \frac{\partial u}{\partial n} dS = 0 \quad (40)$$

$$u = C^I \quad (\text{on } S_I) \quad (41)$$

ここで図5の Y はユニットセル、 S_I および σ_I はそれぞれ、1つの介在物の境界とその内部の領域を表す。また $\Omega = Y \setminus \bigcup_I \sigma_I$ は介在物以外の領域である。

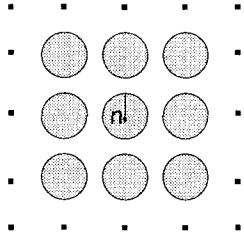


図-4 剛体を有する物質

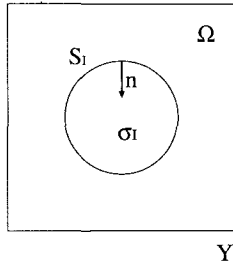


図-5 剛体を有する物質の微視的構造の1周期

ミクロ構造とマクロ構造を結びつけるため、全体構造の平均的な挙動を測るためのマクロスケール $\mathbf{x}$ と非均質性を代表するミクロ構造内の挙動を測るためのミクロスケール $\mathbf{y}$ を導入し、 ε を次のように定義する。

$$\mathbf{x} = \varepsilon \mathbf{y} \quad (42)$$

次に u を

$$u_\varepsilon = u_0 + \varepsilon u_1 + \cdots + \varepsilon^m u_m + \cdots \quad (43)$$

の形式で表現しようと試みる。ここに

$$u_j = u_j(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon}$$

u_j は $\mathbf{y}$ について Y -periodic

である。ここで、 $\mathbf{x}$ と $\mathbf{y}$ を独立変数と考えれば、

$$\frac{\partial}{\partial X_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial y_i} \quad (44)$$

となる。ここに X は真の空間座標である。均質化法の理論によれば

$$u_0 = u_0(\mathbf{x}) \quad \text{in } \Omega \quad (45)$$

となる。また S_I で囲まれる領域が剛体変形をする条件は

$$\frac{\partial u_0}{\partial x_i} + \frac{\partial u_1}{\partial y_i} = 0 \quad \text{in } \sigma_I \quad (46)$$

である。これを解くと

$$u_1 = \frac{\partial u_0}{\partial x_j} \chi^j \quad \text{in } \sigma_I \quad (47)$$

$$\chi^j = -(y_j - C_j^I) \quad \text{in } \sigma_I \quad (48)$$

が得られる。一方 Ω 内での u_1 は

$$-\Delta_y u_1 = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (49)$$

$$u_1 = -\frac{\partial u_0}{\partial x_j} (y_j - C_j^I) \quad \text{on } S_I \quad (50)$$

$$\int_{S_I} \frac{\partial u_1}{\partial n} dS = 0 \quad (51)$$

の解となり、これを解くと、

$$u_1 = \frac{\partial u_0}{\partial x_j} \chi^j + \widetilde{u}_1(\mathbf{x}) \quad \text{in } \Omega \quad (52)$$

が得られる。ここに $\widetilde{u}_1$ は $\mathbf{x}$ の関数であり、 Ω における χ^i は

$$\Delta \chi^i = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (53)$$

$$\chi^i = -(y_i - C_i^I) \quad \text{on } S_I \quad (54)$$

$$\int_{S_I} \frac{\partial \chi^i}{\partial n} dS = 0 \quad (55)$$

を解いて得られる。こうして得られた χ_i を用いると巨視的な弾性定数 A_{ij} は

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \frac{1}{|Y|} \int_{\Omega} (\delta_{ip} + \frac{\partial \chi^i}{\partial y_p}) (\delta_{jp} + \frac{\partial \chi^j}{\partial y_p}) dy \\ &= \delta_{ij} - \frac{1}{|Y|} \int_S t_i y_j dS \end{aligned} \quad (56)$$

となる。ここに

$$t_i = \frac{\partial \chi^i}{\partial n} + n_i \quad \text{on } S \quad (57)$$

であり、上つきの $-$ は Ω から S への極限を表す。以上より、巨視的な弾性定数を評価するためには、周期境界条件のもとで χ^i を求めなければならないことが分かる。

7. 数値例

以下に提案する手法に基づいて得られた数値例を示す。取り扱う問題は1辺の長さが1の正方形ユニットセルに、半径 r の円形、又は長軸 $2a$ 、短軸 $2b$ の楕円形の剛体介在物が x_1 方向に ng_x 、 x_2 方向に ng_y 個並んだ場合を考える (図6)。また剛体介在物がユニットセルの境界をまたぐ場合、ユニットセルから出る部分は図7のように平行移動することにより剛体介在物を配置する。なお介在物1つあたり n 個の境界要素に分割する。

7.1 周期境界を考慮した直接法と、高速多重極法による解の比較

周期境界値問題における高速多重極法を用いて求めた解 (FMM) と、直接法を用いて求めた解 (Direct) との比較を行い、高速多重極法によって求めた解の精度の検証を行った。直接法では、式 (10), (11) を用いてユニットセルの縁に要素を配置することによって周期

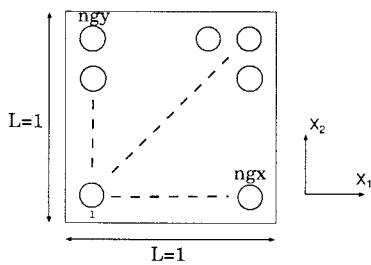


図-6 剛体配置図

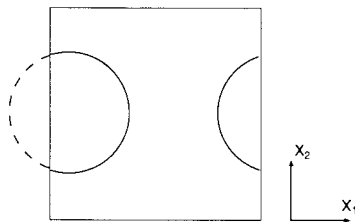


図-7 剛体が境界をまたぐ場合

境界条件を課した。その際、変位が定数の自由度を持つことを考慮し、ユニットセルの縁上の要素の1つで、変位を陽に与えた。ユニットセルは頂点が $(-0.5, -0.5)$, $(-0.5, 0.5)$, $(0.5, -0.5)$, $(0.5, 0.5)$ である正方形とし、その中心に半径0.4の円形の剛体を1つ配置した。剛体の境界上の要素数は200であり、ユニットセルの縁の要素数は1辺あたり200とした。剛体境界上の境界条件はDirichlet条件であり $u = x_2$ とした。得られた解 $(\frac{\partial u}{\partial n})$ を図8に示す。要素番号0は $(0.4, 0)$ に対応する。両者の結果はほぼ一致しており、周期境界値問題における高速多重法の精度が示された。

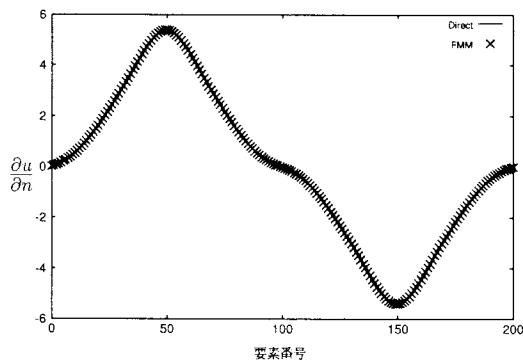


図-8 直接法および高速多重極法によって求めた解の比較

7.2 高速多重極法によって得られた巨視的な弾性定数

種々の条件で、周期境界値問題における高速多重極法を用いて、均質化法の理論から得られた式をもとに巨視的な弾性定数を計算した。簡単のため、剛体が存在しない場合の弾性定数を1とする。

数値計算を行った条件を以下の表1, 表2に示す。円1、円2、円3、円4においては半径の大きさを変化させ、それが巨視的な弾性定数にどのような影響を与え

るかを調べた。剛体の配置は、すべて規則的な配置を剛体に与えた。また円5ではランダムな配置を与えた。

次に剛体の形状が巨視的な弾性定数にどのような影響をもたらすのかについて調べるため、剛体の形状が楕円形のものについて計算を行った。楕円1、楕円2では剛体の重心に規則的な配置を与え、その後 $-\frac{\pi}{4}$ から $\frac{\pi}{4}$ までランダムな回転を与えた。楕円3、楕円4にはランダムな配置を与えた (図9~17参照)。

表-1 各問題の条件 (円)

case	n	r	ng_x	ng_y	剛体の個数
円1	100	0.4	1	1	1
円2	100	0.05	5	5	25
円3	100	0.08	5	5	25
円4	100	0.018	25	25	625
円5	100	0.01	-	-	1000

表-2 各問題の条件 (楕円)

case	n	a	b	ng_x	ng_y	個数
楕円1	100	0.08	0.03	5	5	25
楕円2	100	0.018	0.03	5	5	25
楕円3	100	0.06	0.02	-	-	109
楕円4	100	0.02	0.005	-	-	1103

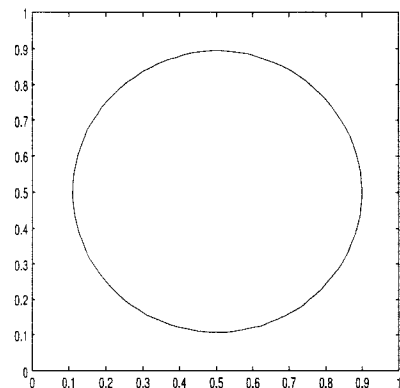


図-9 円1

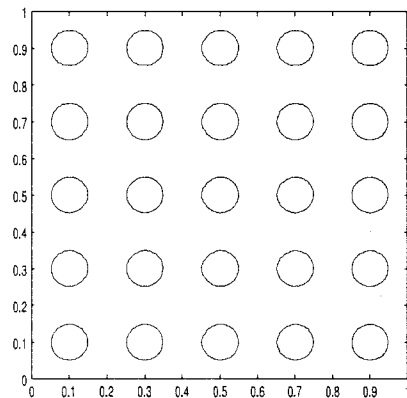


図-10 円2

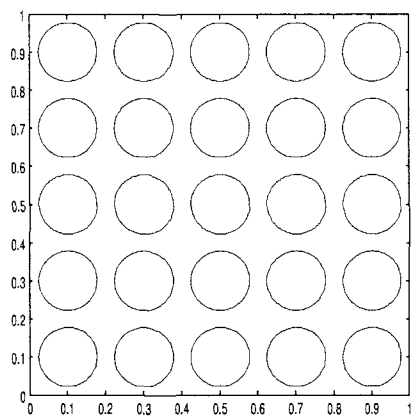


図-11 円 3

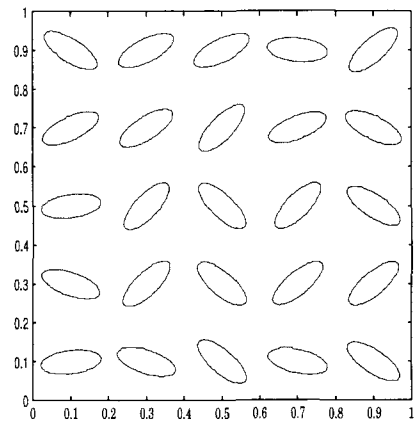


図-14 楕円 1

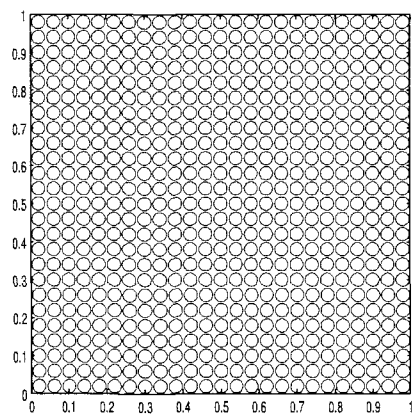


図-12 円 4

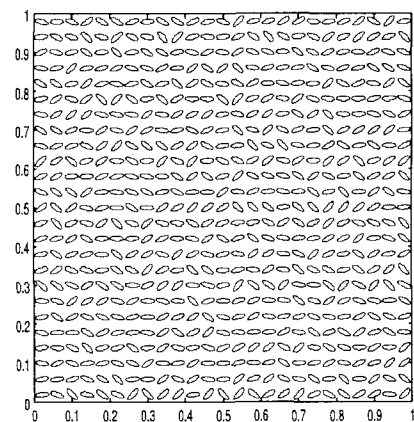


図-15 楕円 2

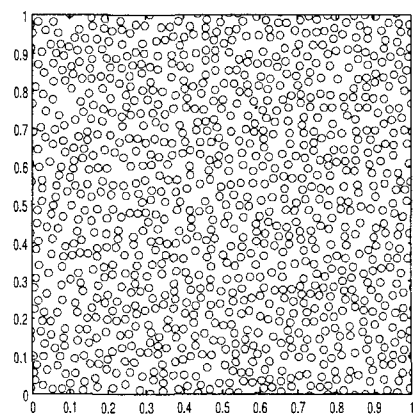


図-13 円 5

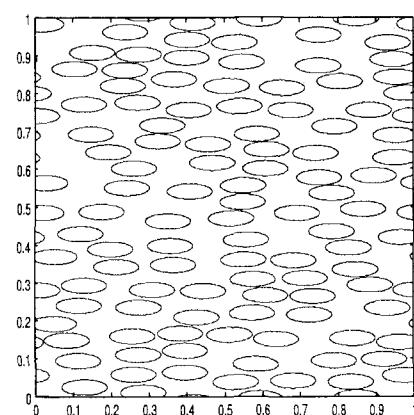


図-16 楕円 3

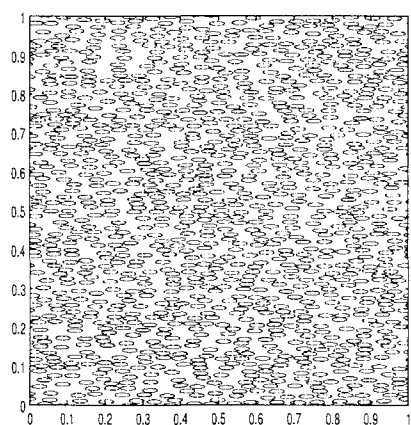


図-17 楕円 4

各条件において、均質化法の理論から導出された巨視的な弾性定数を表 3 に表す。剛体の形状が円形の場合

表-3 各条件において求めた巨視的な弾性定数

case	A_{11}	A_{12}	A_{22}
円 1	3.1008	-1.1403D-7	3.1008
円 2	1.4884	9.1779D-10	1.4884
円 3	3.1009	1.0382D-4	3.1009
円 4	5.0732	-5.0067D-3	5.0736
円 5	1.9929	-1.7403D-3	1.9784
楕円 1	1.8382	4.0636D-2	1.4487
楕円 2	2.3359	2.6488D-2	1.4521
楕円 3	4.1233	-1.0327D-2	2.1104
楕円 4	4.0677	-2.1964D-4	1.7559

合、ユニットセル内において剛体が密に配置されているものほど、その巨視的な弾性定数は大きくなった。ここで円 1 と円 3 は、剛体円の大きさはそれぞれ異なるが、ユニットセルが無限に並んだ周期構造においてはともに同じ構造を表すので、得られる巨視的な弾性定数も同じ値となった。

剛体の形状が楕円形の場合は、円形の場合と違って A_{11} と A_{22} の値が異なり、異方性が現れる事が確認できた。特に楕円形の向きが一方向に統一されている楕円 3、楕円 4 の場合はその影響が顕著に現れた。

7.3 ユニットセル内の剛体の体積比と巨視的な弾性定数の関係

半径 0.0065 の円形剛体をユニットセル内にランダムに配置し、セル内の剛体の体積比と、得られた巨視的な弾性定数の関係を調べた。得られた結果を図 18 に示す。図 18 より、介在物の体積比が増えるごとに巨視的な弾性定数の値も上昇しているのが見て取れる。一方、Liu ら¹⁾は無限弾性体中に、多数の剛体を含む代表体積要素 (RVE) を埋め込み、その両端での平均の変位と応力から巨視的な弾性定数を求めている。しかしその場合、剛体が物質の境界をまたいで配置されないため、物質内に含まれる剛体の個数を増加させても、剛体の配置されない断面が RVE の境界付近に存在する

事になる。そのため剛体の数を増加させても巨視的な弾性定数の上昇率は低下してしまう問題が生じている。しかし本論文で用いた手法では、そのような問題は発生しなかった。これは、本手法ではユニットセルの境界をまたぐ剛体介在物の配置が可能であり、セル境界付近での剛体配置の非均一性が生じないからである。

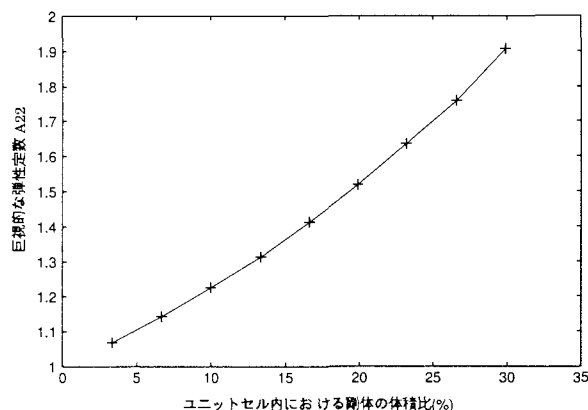


図-18 セル内の剛体の体積比と巨視的な弾性定数 A_{22} の関係

8. 結論

本論文では、剛体介在物の周期境界値問題に多重極法を用い、精度良く解を求めることができた。定式化には発散級数が現れず、従来の定式化に含まれる数学的な不明確さを取り除く事が出来た。また均質化法の理論により微視構造を考慮した巨視的な弾性定数を求める事が可能となった。さらに介在物の体積比と巨視的な弾性定数の関係の解析では、従来の解析結果に見られる不合理さを解消する事ができた。これらのことから、本論文の手法では微視的な構造を効果的に巨視的な物理特性に反映させることできたとと言える。今後の課題としては並列化による計算の高速化や、静弾性問題などへの応用が考えられる。

参考文献

- 1) Y.J. Liu, N. Nishimura, Y. Otani, T. Takahashi, X.L. Chen and H. Munakata, A Fast Boundary Element Method for the Analysis of Fiber-Reinforced Composites Based on a Rigid-Inclusion Model, Journal of Applied Mechanics, **72**, pp.115-128, 2005.
- 2) L. Greengard and V. Rokhlin, A Fast Algorithm for Particle Simulations, Journal of Computational Physics, **73**, pp.325-328, 1987.
- 3) 森口繁一ら, 岩波数学公式 3, 岩波書店, 1977.
- 4) Y.J. Liu and N. Nishimura, The Fast Multipole Boundary Element Method for Potential Problem - A Tutorial, Engineering Analysis with Boundary Elements (to be submitted), 2005.
- 5) J.L. Lions, Remarks on Some Asymptotic Problems in Composite and in Perforated Materials, Variational Methods in the Mechanics of Solids (Ed. S. Nemat-Nasser), Pergamon, pp.3-20, 1980.

- 6) 小林昭一ら, 波動解析と境界要素法, 京都大学学術出版会, 2000.
- 7) 松村知樹, 西村直志, クラックの周期境界値問題における高速多重極法と均質化法への応用について, 計算数理工学論文集, 4, pp.95-100, 2004.
- 8) 大谷佳広, 西村直志, 2次元静弾性クラック周期境界値問題における高速多重極法, 境界要素法論文集, 21, pp.71-76, 2004.
- 9) 寺田賢二郎, 菊地昇, 均質化法入門, 丸善, 2003.

(2005 年 4 月 15 日 受付)